

Среднее расстояние между молекулами в кластере было определено из квантово-механических расчётов и составляет 3.6 Å.

В качестве ИАКП использовано интегральное преобразование в виде основной и запаздывающей логарифмической функции коэффициента молярного поглощения при энергетической шкале $\varepsilon(E)$ [3]:

$$I_A = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{E_1}^{E_2} \lg \varepsilon(E) \cdot \lg \varepsilon(E + \Delta E) dE \quad (5)$$

Статистической обработкой данных методом наименьших квадратов установлена связь между расчётной E_g и интегральными автокорреляционным параметрами спектра (I_A):

$$E_g = G_1 + G_2 I_A \quad (6)$$

где константы $G_1=4,94$ эВ, $G_2=-6,96 \cdot 10^{-2}$ – экспериментально определённые для асфальтенов, коэффициент детерминации для $R^2=0,90$, средняя относительная погрешность 5,18%.

Значения ширины запрещённой зоны для опытных образцов приведены в таблице

№	образцы смол, содержащие асфальтены	ИАКП, эВ	E_g , эВ
1	образец №1	40,49	2,15
2	образец №2	42,57	1,97
6	образец №3	36,64	2,47
7	образец №4	43,76	1,87

Список публикаций:

[1] Sabbah H., Morrow A., Pomerantz A., Zare R. // *Energy Fuels*. 2011. V. 25. № 4. P. 1597.

[2] Доломатов М.Ю., Мукаева Г.Р. // *Журн. прикл. спектроскопии*. 1990. Т. 53. № 6. С. 950.

[3] Латыпов К.Ф., Доломатов М.Ю.. *Определение потенциала ионизации гетероциклических молекул по оптическим спектрам поглощения электромагнитного излучения в видимой и УФ области* // *Фотоника*. – 2017. – №4. – С.78-82.

Теплоемкость легированного иттрием диспрозий-алюминиевого граната

Лезова Ирина Евгеньевна

Санкт-Петербургский государственный университет

Чарная Елена Владимировна, д.ф.-м.н.

i.lezova@spbu.ru

Алюминиевые гранаты, легированные различными редкоземельными ионами, с общей химической формулой $RE_3Al_5O_{12}$ (где RE — редкоземельные ионы) находят широкое применение в лазерной технике [1]. В последние годы большое внимание уделяется установлению возможностей применения данных материалов в различных прикладных технических областях, например, в качестве низкотемпературных магнитных рефрижераторов [2].

В присутствии парамагнитных трехвалентных редкоземельных ионов (за исключением иттрия и лютеция) в решетке гранатов может возникнуть магнитно-упорядоченная фаза в области низких температур. Для $Dy_3Al_5O_{12}$ (DAG) был обнаружен антиферромагнитный переход, что сделало его одним из самых интересных и перспективных соединений, в том числе в системах охлаждения методом адиабатического размагничивания. В настоящее время наиболее актуальными являются исследования смешанных структур, содержащих несколько различных редкоземельных ионов в матрице алюминиевого граната. В зависимости от состава и соотношения между RE в гранатах могут быть получены соединения, обладающие уникальными свойствами, сочетающими в себе преимущества каждого отдельного редкоземельного граната. В частности, было обнаружено что g фактор для монокристалла диспрозий-иттриевого граната (DAG:Y) обладает большой анизотропией, при этом основное состояние данного кристалла можно с большой точностью описать моделью Изинга. Уникальность уже изученных свойств DAG:Y, перспективность его использования, а также отсутствие на сегодняшний день полной достоверной информации о свойствах DAG:Y с различным соотношением редкоземельных ионов в матрице граната, делает актуальным исследования магнитных и тепловых свойств DAG:Y, особенно при низких температурах.

В настоящей работе приводятся результаты экспериментальных исследований теплоемкости серии образцов диспрозий-иттриевых гранатов с различным соотношением ионов диспрозия и иттрия во внешние магнитные поля, а также проведена теоретическая интерпретация полученных результатов. Общая формула

исследуемых соединений $Dy_{3-x}Y_xAl_5O_{12}$, где $x=0, 0.75, 1.5, 2, 2.5, 2.85$. Измерения проводились на установке PPMS-9 + Ever-Cool-II (Quantum Design) в температурном диапазоне от 1.9 до 220 К, в магнитных полях от 0 до 9 Т.

Для всех исследованных кристаллов наблюдался рост теплоемкости при уменьшении температуры. Экспериментальные значения теплоемкости для образцов $Dy_{3-x}Y_xAl_5O_{12}$ (где $x=1.5, 2, 2.5$) были аппроксимированы в температурном диапазоне 1.9-20 К суммой вкладов аномалий Шоттки, и решеточных вкладов, рассчитываемых в рамках моделей Дебая. На основе анализа величины теплоемкости была рассчитана энтропия и магнитная энтропия. Результаты показали, что при увеличении концентрации диспрозия наблюдается рост энтропии во всех исследуемых магнитных полях. Так же было отмечено, при x более 1.5 величина магнитной энтропии положительна, а при x меньше или равных 1.5 значения магнитной энтропии становятся отрицательными. В чистом монокристалле $Dy_3Al_5O_{12}$, наблюдались характерные для подобных соединений антиферромагнитные аномалии теплоемкости λ -типа, при этом величина пика составила порядка 2.55 К, что хорошо согласуется с результатами, полученными ранее [3]

Список публикаций:

[1] А.А. Каминский. // Лазерные кристаллы. Наука, М. 1975. 356 с.

[2] A. Kushino, Y. Aoki, N.Y. Yamasaki, T. Namiki, Y. Ishisaki, T.D. Matsuda, T. Ohashi, K. Mitsuda, T. Yazawa // Erbiumdoped yttrium aluminum garnet as a magnetic refrigerant for low temperature x-ray detectors. J. Appl Phys. 90, 2001. 5812

[3] D. P. Landau, B. E. Keen, B. Schneider, and W. P. Wolf. // Magnetic and Thermal Properties of Dysprosium Aluminum Garnet. I. Experimental Results for the Two-Sublattice Phases Physica. L.Review. 3 (7) 1971. 2310-2342

Высокотемпературный отжиг тонких пленок $a-SiO_x$ различной стехиометрии

Лунев Никита Александрович

Меркулова Ирина Евгеньевна

Институт теплофизики имени С. С. Кутателадзе СО РАН

Замчий Александр Олегович, к.ф.-м.н.

nanochirik9@gmail.com

Тонкие пленки нанокристаллического кремния в матрице его диоксида ($nc-Si/SiO_2$) представляют особый интерес в фотовольтаике и оптоэлектронике. Благодаря квантово-размерному эффекту $nc-Si$ обладают люминесценцией в видимом и ближнем инфракрасном диапазоне при комнатной температуре [1]. В свою очередь материал SiO_2 химически стабилен, высоко прозрачен и используется в микроэлектронике.

Основным методом получения $nc-Si/SiO_2$ является высокотемпературный (800 - 1000°C) отжиг (ВТО) аморфного нестехиометрического оксида кремния ($a-SiO_x$, $0 < x < 2$) [2]. Наряду с основными параметрами отжига (температура и время процесса) важной характеристикой, существенно влияющей на структуру получаемого в процессе ВТО материала, является стехиометрия исходных пленок $a-SiO_x$ [3]. В данной работе исследовалась зависимость размера кристаллита и степени кристалличности от начальной концентрации кислорода в тонких пленках $a-SiO_x$, полученных методом газоструйного химического осаждения с активацией электронно-пучковой плазмой [4].

Тонкие пленки $a-SiO_x$ разной стехиометрии были получены на подложках из кварца и монокристаллического кремния путем изменения расхода G смеси моносилана с аргоном (5% SiH_4 и 95% Ar) в пределах от 18 до 89 н.см³/мин (н.см³ – это см³ при нормальных условиях), при этом расходы H_2 и O_2 оставались неизменными и составляли 386 и 3 н.см³/мин соответственно. Отжиг образцов протекал при температуре 950 °C в течение 2 часов. Структура и состав синтезированного и отожженного материала были изучены методами ИК Фурье-спектроскопии (FTIR), спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) и сканирующей электронной микроскопии [4].

На рис. 1 представлена спектральная зависимость оптической плотности пленок, синтезированных при различных G . Пики в спектрах указывают на наличие Si-O и Si-H связей в материале. Полоса с центром на 640 см⁻¹ соответствует колебаниям вливания и качания Si-H, пики с центром около 790 см⁻¹ и 870 см⁻¹ характерны для колебания изгиба Si-O-Si и ножничного колебания Si-H₂, а полосы на 1045 см⁻¹ и 1160 см⁻¹ указывают на синфазные и противофазные колебания растяжения группы Si-O-Si [5].

Полученные спектры были использованы для расчета концентраций водорода и кислорода в пленках. Так, концентрация связанного водорода изменялась в интервале 1.2 – 3.5 ат.%, кислорода от 20 до 42 ат.% с ростом G .